الباب الثالث

المعادلات الأساسية في ميكانيكا الكم

Basic Equations of Quantum Mechanics

المعادلات الأساسية في ميكانيكا الكم
Basic Equations of Quantum Mechanics

قبل أن نحصل على المعادلات الأساسية في ميكانيكا الكم ، سوف ندرس أهم المؤثرات المستخدمة في ميكانيكا الكم :

(١) مؤثر الموضع (position operator) :

في ميكانيكا الكم فإن مؤثر الموضع يكافئ الكمية الطبيعية المناظرة له ، بمعنى أن :

$$\hat{x} = x \quad , \quad \hat{y} = y \quad , \quad \hat{z} = z$$

وبصورة عامة فإن : $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$

أيضا : فإن أي دالة تعتمد على الموضع مثل طاقة الجهد $V(\vec{r})$ فإن المؤثر المناظر لها يكافئها : $\hat{V}(\vec{r}) = V(\vec{r})$

(٢) مؤثر كمية الحركة الخطية (Linear momentum oper.) :

يعبر عن مؤثر كمية الحركة الخطية في ميكانيكا الكم بالعلاقة :-

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \, , \; \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \, , \; \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$$

وبوجه عام فإن :

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

حيث

$$\vec{\nabla} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

الإثبات :

بأخذ الصورة العامة للدالة الموجية لجسيم يتحرك في اتجاه محور x :

$$\psi = \psi_o e^{i(kx - wt)}$$

بتفاضل الطرفين بالنسبة إلى x :

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik\psi \ = i\frac{p_x}{\hbar}\psi$$

[من قاعدة دى برولى $p_x = k\hbar \leftarrow k = \frac{p_x}{\hbar}$]

بضرب الطرفين في $\frac{\hbar}{i}$

$$\therefore \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x\psi \qquad \therefore \hat{p}_x\psi = p_x\psi \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (1)$$

حيث : $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$

المعادلة (1) هي معادلة القيمة الذاتية للمؤثر $\hat{p}_x$ حيث :

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

وبالمثل يمكن إيجاد علاقات مماثلة لكل من $\hat{p}_y, \hat{p}_z$

وبوجه عام فإن : $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$

(٣) مؤثر الطاقة (Energy operator) :

يعبر عن مؤثر الطاقة في ميكانيكا الكم بالعلاقة : $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

الإثبات :

حيث أن : $\psi = \psi_o e^{i(kx-wt)}$

بتفاضل الطرفين بالنسبة للزمن :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -iw\psi = -i\frac{E}{\hbar}\psi$$

[من معادلة بلانك $E = \hbar\omega \leftarrow \omega = \frac{E}{\hbar}$]

بضرب الطرفين في $-\dfrac{\hbar}{i}$

$$\therefore -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$$

$$\therefore \hat{E}\psi = E\psi \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_}(2)$$

حيث $\hat{E} = -\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial t} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$

المعادلة (2) هي معادلة القيمة الذاتية للمؤثر $\hat{E}$ حيث : $\hat{E} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$

(٤) مؤثر هاملتون (Hamiltonian operator) :

في الميكانيكا الكلاسيكية فإن الهاملتونيان (أو دالة هاملتون) لأي نظام يعبر عنه بمجموع طاقتي الحركة والجهد

وفي ميكانيكا الكم : يكون مؤثر هاملتون مساوياً لمجموع مؤثري طاقة الحركة والجهد .

فإذا كانت $\hat{T}$ مؤثر طاقة الحركة ، $\hat{V}$ مؤثر طاقة الجهد فإن : $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

ولكن :

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

$$\hat{p}^2 = \hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}} = \left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right) = -\hbar^2(\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}) = -\hbar^2\nabla^2$$

حيث :

$$\nabla^2 = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

هي مؤثر لابلاس (اللابلاسيان) .

$$\therefore \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

وهو مؤثر طاقة الحركة في ميكانيكا الكم .

أيضاً: مؤثر طاقة الجهد : $\hat{V}(\vec{r}) = V(\vec{r})$

$$\therefore \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

وهي صورة مؤثر هاملتون في ميكانيكا الكم .

ملحوظة : يلاحظ أن لدينا صورتان لمؤثر الطاقة الكلية :

١- صورة تعتمد على الزمن :

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

٢- صورة لا تعتمد على الزمن :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

بحيث أن $\hat{H} = \hat{E}$

$$\therefore \hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

المعادلة الأساسية في ميكانيكا الكم (معادلة شرودنجر) :

بكتابة معادلة القيمة الذاتية للمؤثر $\hat{H}$ بالصورة : $\hat{H}\psi = E\psi$

وتعرف هذه المعادلة بمعادلة شرودنجر (Schrodinger Equation)

وهي المعادلة الأساسية في ميكانيكا الكم .

ويمكن كتابتها في صورتين :

(١) صورة تعتمد على الزمن (Time dependent sch.E.)

$$\hat{H}\psi = E\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

وتعرف المعادلة $\boxed{E\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}}$ بمعادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن .

(٢) صورة لا تعتمد على الزمن (Time-independent sch.E)

$$\hat{H}\psi = E\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi$$

وتعرف العلاقة $\boxed{E\psi=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi}$ بمعادلة شرودنجر المستقلة عن الزمن ويمكن كتابتها بصورة أخرى كتالي :

$$E\psi=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi$$

فبضرب الطرفين في $-\frac{2m}{\hbar^2}$

$$\therefore -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=\nabla^2\psi-\frac{2m}{\hbar^2}V\psi$$

$$\boxed{\nabla^2\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0}$$

وهي الصورة المعروفة لمعادلة شرودنجر (الغير معتمدة على الزمن) .

أمثلة محلوله على مؤثرات ميكانيكا الكم :

مثال(١): أثبت أن مؤثر كمية الحركة الخطية $\hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ هو مؤثر خطي وهيرميتي .

الحل :

أولاً : لإثبات أن $\hat{p}_x$ مؤثر خطي

$$\text{(i) } \hat{p}_x(\psi+\phi)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(\psi+\phi)=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)=\hat{p}_x\psi+\hat{p}_x\phi \quad \_\_\_\text{(1)}$$

$$\text{(ii) } \hat{p}_x(\alpha\psi)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(\alpha\psi)=\alpha\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}=\alpha\,\hat{p}_x\psi \quad \_\_\_\text{(2)}$$

من (2) و (1) يتضح أن $\hat{p}_x$ هو مؤثر خطي .

ثانياً:- لإثبات أن $\hat{p}_x$ هو مؤثر هيرميتي :

لإثبات ذلك نثبت أن :

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{p}_x\phi\,dx}_{L.H.S}=\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\phi\,\hat{p}_x^*\psi^*\,dx}_{R.H.S}$$

$$L.H.S. = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x \phi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi \, dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \phi}{\partial x} dx$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* d\phi \qquad \left| \; d\phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} dx \right.$$

وبإجراء التكامل بالتجزئي

$$\psi(\pm\infty) = 0$$
$$\psi^*(\pm\infty) = 0$$
$$\psi'(\pm\infty) = 0$$

$$L.H.S. = \frac{\hbar}{i} \left[\psi^* \phi \; \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \phi \, d\psi^* \right]$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \phi \, \underbrace{d\psi^*} \;\; = -\frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \phi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \phi \left(\frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi \, \hat{p}_x^* \psi^* dx = R.H.S.$$

وهذا يعني أن المؤثر $\hat{p}_x$ هو مؤثر هيرميتي .

<u>مثال(٢):</u> أثبت أن مؤثر هاملتون المعطى بالصورة :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

هو مؤثر هيرميتى .

<u>الحـــل:</u>

المطلوب إثبات :

$$\underbrace{\int \psi^* \hat{H} \phi \, dx}_{L.H.S} = \int \phi \hat{H}^* \psi^* dx = \underbrace{\int \phi \hat{H} \psi^* dx}_{R.H.S.} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(1)}$$

$$L.H.S. = \int \psi^* \hat{H} \phi \, dx = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \phi \, dx = I_1 + I_2 \qquad \text{\_\_(2)}$$

$$I_2 = \int \psi^* V \phi \, dx = \int \phi V \psi^* dx \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_(3)}$$

$$I_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^* \frac{\partial \phi'}{\partial x}dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* d\phi' \qquad \left| \begin{array}{l} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \phi' \\ d\phi' = \frac{\partial \phi'}{\partial x}dx \end{array} \right.$$

وبإجراء التكامل بالتجزئي :

$$I_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^* \phi \;\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \phi' d\psi^*\right]$$

ويلاحظ أن الحد الأول يساوي صفرا لأنه عند $\pm\infty$ فإن : $\psi, \phi, \psi', \phi' = 0$

$$\therefore I_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \phi' d\psi^* = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \phi' \frac{\partial \psi^*}{\partial x}dx$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*'} d\phi \qquad \left| \begin{array}{l} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} = \psi^{*'} \\ d\phi = \frac{\partial \phi}{\partial x}dx = \phi' dx \end{array} \right.$$

وبإجراء التكامل بالتجزئي مرة أخرى :

$$I_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^{*'} \phi \;\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \phi \, d\psi^{*'}\right] = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \phi \, d\psi^{*'} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \phi \frac{\partial \psi^{*'}}{\partial x}dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \phi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}dx \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(4)}$$

بالتعويض من (4) و (3) في (2) :

$$L.H.S. = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \phi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2}dx + \int \phi V \psi^* dx = \int \phi \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\psi^* dx$$

$$= \int \phi \hat{H} \psi^* dx = R.H.S.$$

وهو المطلوب .

مثال(٣): أثبت أن القيمة المتوقعة لكمية الحركة الخطية p_x هي كمية حقيقية .

الحــل: المطلوب إثبات أن :- $\langle p_x\rangle=\langle p_x\rangle^*$

$$\langle p_x\rangle=\int\psi^*\hat{p}_x\psi\,dx=\int\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\,dx=\frac{\hbar}{i}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx=\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*d\psi$$

وبإجراء التكامل بالتجزئ مع اعتبار أن $\psi(\pm\infty)=0$

$$\therefore\langle p_x\rangle=\frac{\hbar}{i}\left[\psi^*\psi\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\psi\,d\psi^*\right]=-\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\psi\,\underbrace{d\psi^*}=-\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}dx$$

$$=\int\psi\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi^*dx=\int\psi\,\hat{p}_x\psi^*dx=\left[\int\psi^*\,\hat{p}_x\psi\,dx\right]^*=\langle p_x\rangle^*$$

مثال(٤): أثبت أن القيمة المتوقعة لدالة هاملتون (ككمية طبيعية) تساوي الطاقة الكلية E ، حيث مؤثر هاملتون المناظر للطاقة الكلية يعطى بالعلاقة :

$$\hat{H}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

الحــل:

القيمة المتوقعة لدالة هاملتون :

$$\langle H\rangle=\int\psi^*\hat{H}\psi\,dV=\int\psi^*\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi\,dV\qquad\_\_\_\_(1)$$

وبأخذ الدالة الموجية في صورتها العامة :

$$\psi(\bar{r},t)=\psi_0e^{i(\bar{k}\cdot\bar{r}-\omega t)}=\underbrace{\psi_0e^{i(\bar{k}\cdot\bar{r})}}\cdot e^{-i\omega t}=\psi(\bar{r})\cdot e^{-i\omega t}$$

حيث $\psi(\bar{r})=\psi_oe^{i(\bar{k}\cdot\bar{r})}$ ، وحيث أن $\omega=\dfrac{E}{\hbar}$ فإن :

$$\psi(\bar{r},t)=\psi(\bar{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

وهي الصورة العامة للدالة $\psi(\bar{r},t)$ كحاصل ضرب دالتين إحداهما دالــة فــي $\bar{r}$ والأخرى في t .

بالتعويض في (1) :

$$\langle H\rangle = i\hbar\int \psi^*(\bar{r})e^{\frac{iE}{\hbar}t}\cdot\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi(\bar{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\right]}dV$$

$$= i\hbar\int \psi^*(\bar{r})e^{\frac{iE}{\hbar}t}\cdot\left(\frac{-iE}{\hbar}\right)\psi(\bar{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\,dV$$

$$= \int \psi^*(\bar{r})E\psi(\bar{r})dV = E\int\underbrace{\psi^*(\bar{r})\psi(\bar{r})dV}_{1} = E \qquad (2)$$

وذلك حيث أن الدالة $\psi(\bar{r})$ هي دالة معايرة $\left[\int\psi^*\psi\, dV = 1\right]$

وهو المطلوب .

<u>مثال(٥) :</u> أ- أحسب مبدول (commutator) مؤثر كمية الحركة الخطية والموضع بالصورة : $[\hat{p}_x, x] = \frac{\hbar}{i}\hat{I}$

ب- أحسب مبدول مؤثر الطاقة الكلية و الزمن بالصورة : $\left[\hat{E}, t\right] = i\hbar\hat{I}$

ج- أثبت أن مبدول كمية الحركة الخطية $\hat{p}_x$ وطاقة الجهد $V(x)$ يكتب بالصورة :

$$[\hat{p}_x, V(x)] = \frac{\hbar}{i}\frac{dV(x)}{dx}$$

<u>الحل:</u> <u>أولاً:</u>

$$[\hat{p}_x, x]\psi = (\hat{p}_x x - x\hat{p}_x)\psi = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}\underbrace{x\psi} - x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi - x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\psi$$

$$\therefore [\hat{p}_x, x] = \frac{\hbar}{i}\hat{I} \qquad (1)$$

ثانياً :

$$\left[\hat{E},t\right]\psi=(\hat{E}t-t\hat{E})\psi \quad =i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\underbrace{t\psi}-t\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)$$

$$=i\hbar\left(t\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi-t\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)=i\hbar\psi$$

$$\therefore\left[\hat{E},t\right]=i\hbar\hat{I} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (2)}$$

ثالثا:

$$\left[\hat{p}_x,V\right]\psi=(\hat{p}_xV-V\hat{p}_x)\psi \;=\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}V\psi-V\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$=\frac{\hbar}{i}\left(V\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}\psi-V\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V(x)}{\partial x}\psi$$

$$\therefore\left[\hat{p}_x,V(x)\right]=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V(x)}{\partial x} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (3)}$$

وهو المطلوب .

مثال(٦): إذا كان $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x)$ هو مؤثر هاملتون لنظام ما ، فأثبت أن :

$$\left[x,\left[x,\hat{H}\right]\right]=-\frac{\hbar^2}{m}\hat{I}$$

الحـل:

$$\left[x,\hat{H}\right]\psi=\left[x,\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V\right)\right]\psi \;=\left[x,\frac{\hat{p}^2}{2m}\right]\psi+\left[x,V\right]\psi \qquad \text{\_\_\_\_\_ (1)}$$

ولكن :

$$\left[x,\frac{\hat{p}^2}{2m}\right]\psi=\left[x,-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[x,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]\psi$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(x\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}x\right)\psi \qquad \left|\;\hat{p}^2=\hat{p}\hat{p}=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right.$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}x\psi\right) \qquad \text{\_\_\_\_\_ (2)}$$

أيضاً فإن :

$$\frac{\partial^2 (x\psi)}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right] = \frac{\partial}{\partial x}\left[x\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi\right]$$

$$= x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial x} = x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + 2\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

بالتعويض في (2) :

$$\left[x, \hat{P}^2\!\big/_{2m}\right]\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - 2\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\psi}{\partial x} \qquad \text{\_\_(3)}$$

أيضاً : $[x,V]\psi = (xV - Vx)\psi = 0.\psi \rightarrow [x,V] = \hat{0}$

بالتعويض في (1) :

$$\left[x,\hat{H}\right]\psi = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\psi}{\partial x} + 0.\psi = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\therefore \left[x,\hat{H}\right] = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(4)}$$

والآن :

$$\therefore \left[x,\left[x,\hat{H}\right]\right] = \left[x, \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

$$\therefore \left[x,\left[x,\hat{H}\right]\right]\psi = \left[x, \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi = \frac{\hbar^2}{m}\left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\psi\right)$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\right) = -\frac{\hbar^2}{m}\psi$$

$$\therefore \left[x,\left[x,\hat{H}\right]\right] = -\frac{\hbar^2}{m}\hat{I} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_(5)}$$

وهو المطلوب .

مثال(٧): إذا كان مؤثر هاملتون للمتذبذب التوافقي البسيط يعطى بالصورة :

$$\hat{H} = \hat{p}_x^2 / 2m + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

فاثبت أن :

(i) $\left[\hat{x}, \hat{H}\right] = i\hbar \left(\frac{\hat{p}_x}{m}\right) = i\hbar \hat{\dot{x}}$

حيث $\hat{\dot{x}} = \frac{\hat{p}_x}{m}$ هو مؤثر السرعة

(ii) $\left[\hat{p}_x, \hat{H}\right] = \frac{\hbar}{i}(m\omega^2 x)$

الحـل:

$$\text{(i)}\ \left[\hat{x}, \hat{H}\right]\psi = \left[x, \left(\hat{p}_x^2 / 2m + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right)\right]\psi$$

$$= \left[x, \hat{p}_x^2 / 2m\right]\psi + \left[x, \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right]\psi$$

$$= \frac{1}{2m}\left[x, \hat{p}_x^2\right]\psi + \frac{1}{2} m\omega^2 \left[x, x^2\right]\psi \ \_\_\_\_(1)$$

ولكن :

$$\left[x, \hat{p}_x^2\right]\psi = (x\hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2 x)\psi$$

$$= -\hbar^2 \left(x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi)\right) \qquad \left|\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right.$$

أيضاً :

$$\frac{\partial^2 (x\psi)}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right]$$

$$= \frac{\partial}{\partial x}\left[x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi\right] = x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} = x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\therefore\ [x, \hat{p}_x^2]\psi = -\hbar^2\left\{x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - 2\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\} = 2\hbar^2\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\therefore [x, \hat{p}_x^2] = 2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (2)$$

أيضاً:

$$[x, x^2]\ \psi = (x\cdot x^2 - x^2\cdot x)\psi = 0.\psi$$

$$\therefore [x, x^2] = \hat{0} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (3)$$

بالتعويض في (1) :

$$[x, \hat{H}]\psi = \frac{1}{2m}\left(2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi + 0.\psi = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\therefore [x, \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{i\hbar}{m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$$

$$= i\hbar\left(\frac{\hat{p}_x}{m}\right) = i\hbar\hat{\dot{x}}$$

حيث $\hat{\dot{x}} = \dfrac{\hat{p}_x}{m}$ هي مؤثر السرعة .

$$\text{(ii)}\ [\hat{p}_x, \hat{H}]\psi = \left\{\left[\hat{p}_x, \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\right]\right\}\psi$$

$$= \left\{\left[\hat{p}_x^2, \hat{p}_x^2/2m\right] + \left[\hat{p}_x, \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\right\}\psi$$

$$= \left\{\frac{1}{2m}[\hat{p}_x, \hat{p}_x^2] + \frac{1}{2}m\omega^2[\hat{p}_x, x^2]\right\}\psi \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (4)$$

ولكن :

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_x^2]\ \psi = (\hat{p}_x\hat{p}_x^2 - \hat{p}_x^2\hat{p}_x)\psi$$

$$= \left\{\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\left(\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)\right\}\psi$$

$$= \left\{\frac{-\hbar^3}{2im}\frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{\hbar^3}{2im}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\right\}\psi = 0\psi$$

$$\therefore \left[\hat{p}_x, \hat{p}_x^2\right] = \hat{0} \qquad \text{(5)}$$

أيضاً :

$$\left[\hat{p}_x, x^2\right]\psi = (\hat{p}_x x^2 - x^2 \hat{p}_x)\psi = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)x^2\psi - x^2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$$

ولكن :

$$\frac{\partial(x^2\psi)}{\partial x} = x^2\frac{\partial\psi}{\partial x} + 2x\psi$$

$$\therefore \left[\hat{p}_x, x^2\right]\psi = \frac{\hbar}{i}\left\{x^2\frac{\partial\psi}{\partial x} + 2x\psi - x^2\frac{\partial\psi}{\partial x}\right\} = \frac{2\hbar}{i}x\psi$$

$$\therefore \left[\hat{p}_x, x^2\right] = \frac{2\hbar}{i}x \qquad \text{(6)}$$

بالتعويض في (4) :

$$\left[\hat{p}_x, \hat{H}\right]\psi = \left\{\frac{1}{2m}(0) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{2\hbar}{i}x\right)\right\}\psi = \frac{\hbar}{i}m\omega^2 x\psi$$

$$\therefore \left[\hat{p}_x, \hat{H}\right] = \frac{\hbar}{i}(m\omega^2 x\psi)$$

وهو المطلوب .

<u>مثال(٨):</u> إذا كان $x, \hat{p}_x$ هما مؤثرا الموضع وكمية الحركة ويرتبطان بالعلاقة $\left[\hat{p}_x, x\right] = \frac{\hbar}{i}\hat{I}$ ، وكان المؤثران $\hat{a}, \hat{a}^+$ يعرفان بالعلاقتين :

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\omega}\hat{p}_x\right)$$

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}\hat{p}_x\right)$$

فأثبت أن : $\left[\hat{a}^+, \hat{a}\right] = \hat{I}$

الحــل:

$$[\hat{a}^+,\hat{a}]\psi=\frac{m\omega}{2\hbar}\left[\left(x+\frac{i}{m\omega}\hat{p}_x\right),\left(x-\frac{i}{m\omega}\hat{p}_x\right)\right]\psi$$

$$=\frac{m\omega}{2\hbar}\left\{\left[\left(x+\frac{i}{m\omega}\hat{p}_x\right),x\right]+\left[\left(x+\frac{i}{m\omega}\hat{p}_x\right),-\frac{i}{m\omega}\hat{p}_x\right]\right\}\psi$$

$$=\frac{m\omega}{2\hbar}\left\{[x,x]+\frac{i}{m\omega}[\hat{p}_x,x]-\frac{i}{m\omega}[x,\hat{p}_x]+\frac{1}{m^2\omega^2}[\hat{p}_x,\hat{p}_x]\right\}\psi \quad \text{\_\_(1)}$$

ولكن :

$$[x,x]\psi=(x\cdot x-x\cdot x)\psi=0.\psi \qquad \therefore [x,x]=0$$

$$[\hat{p}_x,\hat{p}_x]\psi=(\hat{p}_x\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{p}_x)\psi=0.\psi \qquad \therefore [\hat{p}_x,\hat{p}_x]=0$$

$$[\hat{p}_x,x]=\frac{\hbar}{i}\hat{I} \quad , [x,\hat{p}_x]=-[\hat{p}_x,x]=-\frac{\hbar}{i}\hat{I}$$

بالتعويض في (1) نحصل على :

$$[\hat{a}^+,\hat{a}]\psi=\frac{m\omega}{2\hbar}\left\{0+\frac{i}{m\omega}\left(\frac{\hbar}{i}\hat{I}\right)-\frac{i}{m\omega}\left(\frac{-\hbar}{i}\hat{I}\right)+0\right\}\psi$$

$$=\frac{m\omega}{2\hbar}\left\{\frac{2\hbar}{m\omega}\hat{I}\right\}\psi \;=\hat{I}\psi$$

$$\therefore [\hat{a}^+,\hat{a}]=\hat{I}$$

وهو المطلوب .

أمثلة على معادلة شرودنجر (Schrodinger Equat.)

تمثل معادلة شرودنجر معادلة القيمة الذاتية لمؤثر هاملتون بالصورة الآتية :

$\hat{H}\psi = E\psi$ حيث :

(١) $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$ في حالة عدم الاعتماد على الزمن

(٢) $\hat{H} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$ في حالة الاعتماد على الزمن

ومن ذلك استنتجنا معادلتين لشرودنجر بالصورة الآتية :

(١) المعادلة المعتمدة على الزمن : $E\psi = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi$

(٢) المعادلة المستقلة عن الزمن : $\nabla^2\psi + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0$

وتعتبر معادلة شرودنجر هي المعادلة الأساسية في ميكانيكا الكم ، وسوف نعطى في هذه الفقرة بعض الأمثلة المحلولة على هذه المعادلة .

<u>مثال(١):</u> كيف تحصل على معادلة شرودنجر الغير معتمدة على الزمن باستخدام المبادئ الأولية .

<u>الحل:</u> الصورة العامة للدالة الموجية التي تمثل الحزمة الموجية المصاحبة للجسيم أثناء حركته هي : $\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$

بتفاضل هذه العلاقة بالنسبة إلى x :

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = ik\psi$$

$$\therefore \frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x} = (ik\psi)(ik) = -k^2\psi$$

$$\therefore \frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x} + k^2\psi = 0 \qquad \_\_\_\_\_\_(1)$$

وتعرف هذه المعادلة بالمعادلة الموجيه (Wave equation) .

ومن علاقات دى برولى : $k = \frac{p_x}{\hbar} \leftarrow p_x = \hbar k$

$$\therefore \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\hat{p}_x}{\hbar^2} \psi = 0 \qquad \_\_\_\_(2)$$

وحيث أن الطاقة الكلية : $E = \frac{p_x^2}{2m} + V$

$$\therefore \frac{p_x^2}{2m} = E - V \quad \therefore p_x^2 = 2m(E - V) \_\_\_\_(3)$$

من (3) و (2) :

$$\therefore \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$

وهي معادلة شرودنجر التي تصف حركة جسيم يتحرك في اتجاه محور x (في بعد واحد) وفي حالة الحركة في ثلاثة أبعاد فإن هذه المعادلة تأخذ الصورة :

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$

حيث :

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

<u>مثال(٢):</u> كيف تحصل على المعادلة المعتمدة على الزمن لشرودنجر بالصورة : $E\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ باستخدام المبادئ الأولية .

<u>الحل:</u> حيث أن :

$$\psi = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$$

فبالتفاضل بالنسبة للزمن :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi$$

ومن معادلة بلانك :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \leftarrow E = \hbar\omega$$

$$\therefore \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi = \frac{E}{i\hbar}\psi$$

بالضرب في $i\hbar$:

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$$

وهي معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن .

<u>مثال(٣):</u> أثبت أن الجزء المعتمد على الزمن من الدالة الموجيه تكون صورته بالشكل : $e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$.

<u>الحل:</u> حيث أن الصورة العامة للدالة الموجية هي :

$$\psi(\bar{r},t) = \psi_0 e^{i(\bar{k}\cdot\bar{r}-\omega t)} = \underbrace{\psi_0 e^{i(\bar{k}\cdot\bar{r})}}\cdot\underbrace{e^{-i\omega t}} = \underbrace{\psi(\bar{r})}\cdot\underbrace{\phi(t)}$$

حيث :

$$\psi(\bar{r}) = \psi_0 e^{i(\bar{k}\cdot\bar{r})}$$
$$\phi(t) = e^{-i\omega t}$$

حيث الجزء المعتمد على الزمن من الدالة الموجيه هو :

$$\phi(t) = e^{-i\omega t} = e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t} = e^{-i\frac{iE}{\hbar}t}$$

[استخدمنا علاقة بلانك $\omega = \frac{E}{\hbar}$]

وهو المطلوب .

<u>مثال(٤):</u> كيف تحصل على معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن باستخدام معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن .

الحــل: معادلة شرودنجر غير المعتمدة على الزمن :

$$\nabla^2\psi(\bar{r})+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi(\bar{r})=0$$

وبضرب الطرفين في $e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$:

$$\nabla^2\psi(\bar{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi(\bar{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}=0$$

وبأخذ الدالة الموجية المعتمدة على الزمن :

$$\Psi=\psi(\bar{r},t)=\psi(\bar{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

$$\therefore \nabla^2\Psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\Psi=0$$

$$\therefore E\Psi=\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi \qquad \text{\_\_\_\_\_\_}(2)$$

وبتفاضل $\Psi(\bar{r},t)$ بالنسبة للزمن :-

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}E\Psi$$

$$\therefore E\Psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad \text{\_\_\_\_}(3)$$

من (3) و (2) :

$$\therefore \frac{-\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi$$

$$\therefore \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad \text{\_\_\_\_\_}(4)$$

وهي معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن وتمثل الدالة $\Psi(\bar{r},t)$ حلا لها .

مثال(٥): أثبت أن معادلة شرودنجر تكون خطية في الدالة الموجيه $\Psi(x,t)$.

الحـل: سوف نثبت أنه إذا كان $\Psi_1(x,t),\Psi_2(x,t)$ حلان لمعادلة شرودنجر لجهد معين V فإن الدالة :

$$\Psi(x,t)=C_1\Psi_1(x,t)+C_2\Psi_2(x,t)\_\_\_\_\_(1)$$

تكون حلا لهذه المعادلة ، حيث C_1,C_2 ثوابت اختيارية

معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

وفي بعد واحد (للتبسيط) :

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=0$$

وبالتعويض عن الخاصية الخطية في هذه المعادلة فلا بد أن تتحقق

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(c_1\Psi_1+c_2\Psi_2)+V(c_1\Psi_1+c_2\Psi_2)-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(c_1\Psi_1+c_2\Psi_2)=0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(c_1\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2}+c_2\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2}\right)+V(c_1\Psi_1+c_2\Psi_2)-i\hbar\left(c_1\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2}+c_2\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2}\right)=0$$

$$\therefore c_1\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2}+V\Psi_1-i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\right]+c_{21}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi_2}{\partial x^2}+V\Psi_2-i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right]=0$$

ولكي تتحقق هذه المعادلة يجب أن يساوي كل قوس صفرا حيث Ψ_1,Ψ_2 هي حلول لهذه المعادلة لقيمة V الواحدة .

وهذا هو شرط أن يكون الجمع الخطي في (1) هو حل لمعادلة شرودنجر

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\Psi_1}{\partial x^2}+V\Psi_1=i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\Psi_2}{\partial x^2}+V\Psi_2=i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}$$

وهو المطلوب .

مثال(٦): أثبت أن الدالة الموجيه للمتذبذب التوافقي البسيط بالصورة :

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\alpha x^2 - ibt}$$

تمثل حلا لمعادلة شرودنجر لجهد مناسب $V(x) = \frac{\alpha}{2}x^2$ ، حيث :

$$a = \frac{\sqrt{\alpha m}}{2\hbar} \quad , \quad b = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

الحـل: معادلة شرودنجر :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\alpha}{2}x^2\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

ولإثبات أن الدالة الموجيه المعطاة تمثل حلا لهذه المعادلة نوجد :

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \Psi(-\alpha)(2x) = -2\alpha x\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -2\alpha(x)(-2\alpha x\Psi) - 2\alpha\Psi$$

$$= 4\alpha^2x^2\Psi - 2\alpha\Psi$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \Psi(-ib) = -ib\Psi$$

وبالتعويض في معادلة شرودنجر :

$$L.H.S. = -\frac{\hbar^2}{2m}(4\alpha^2x^2\Psi - 2\alpha\Psi) + \frac{\alpha}{2}x^2\Psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\alpha m}{\hbar^2}x^2\Psi - \sqrt{\frac{\alpha m}{\hbar}}\Psi\right) + \frac{\alpha}{2}x^2\Psi$$

$$= -\frac{\alpha}{\hbar^2}x^2\Psi + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\Psi + \frac{\alpha}{2}x^2\Psi = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\Psi$$

$$R.H.S. = i\hbar(-ib\Psi) = i\hbar\left(-\frac{i}{2}\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\right)\Psi = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\Psi$$

أي أن الطرفان متساويان وبذلك فإن الدالة الموجيه المعطاة تحقق معادلة شرودنجر أي انها تمثل حلا لها للجهد المعطى .

مثال(٧): باستخدام معادلة شرودنجر بالصورة :

$$\nabla^2\psi_n + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - V)\psi_n = 0$$

حيث μ هي كتلة الجسيم المتحرك

كيف تحصل على الخاصية التعامدية العيارية لمجموعة الدوال الذاتية ψ_n .

الحـل: بكتابة معادلة شرودنجر للدالتين ψ_n, ψ_m

$$\nabla^2\psi_n + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - V)\psi_n = 0 \qquad \_\_\_(1)$$

$$\nabla^2\psi_m + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - V)\psi_m = 0 \qquad \_\_\_(2)$$

حيث E_n, E_m هي القيم الذاتية المناظرة للدالتين ψ_n, ψ_m

بأخذ المرافق المركب للمعادلة (2) :-

$$\nabla^2\psi_m^* + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_m - V)\psi_m^* = 0 \qquad \_\_\_(3)$$

بضرب (1) في ψ_m^* و (3) في ψ_n وطرح المعادلتين الناتجتين :-

$$\psi_m^*\nabla^2\psi_n + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - V)\psi_m^*\psi_n = 0$$

$$\psi_n\nabla^2\psi_m^* + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_m - V)\psi_n\psi_m^* = 0$$

$$\therefore \psi_m^*\nabla^2\psi_n - \psi_n\nabla^2\psi_m^* + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - E_m)\psi_m^*\psi_n = 0$$

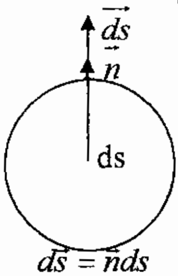
وباستخدام نظرية جرين في المتجهات :

$$\vec{\nabla}\cdot(\psi_m^*\nabla\psi_n - \psi_n\nabla\psi_m^*) + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - E_m)\psi_m^*\psi_n = 0$$

وبتكامل هذه العلاقة بالنسبة إلى الحجم V :

$$\int\vec{\nabla}\cdot(\psi_m^*\nabla\psi_n - \psi_n\nabla\psi_m^*)dV + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - E_m)\int\psi_m^*\psi_n dV = 0 \_\_(4)$$

ومن نظرية التباعد لجاوس (Gauss divergence theorem)

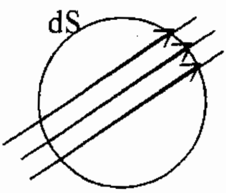


$$\int (\vec{\nabla}\cdot\vec{A})dV = \oint \vec{A}\cdot\vec{ds}$$

$$\therefore \int (\vec{\nabla}\cdot\vec{A})dV = \oint \vec{A}\cdot\vec{n}\,ds = \oint A_n ds$$

حيث $A_n = \overline{A}\cdot\vec{n} \leftarrow$ مركبة $\overline{A}$ في اتجاه $\vec{n}$

يسمى التكامل $\Phi = \oint A_n ds = \oint \overline{A}\cdot d\overline{s}$ بفيض (flux) المتجه $\overline{A}$ عبر المساحة dS .



ويمثل الفيض بعدد خطوط مجال المتجه التي تعبر المساحة dS

وتصبح المعادلة رقم (4) [وذلك بوضع : $\psi_m^*\vec{\nabla}\psi_n - \psi_n\vec{\nabla}\psi_m^* = \overline{A}$] :

$$\int \vec{\nabla}\cdot\overline{A}dV + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - E_m)\int \psi_m^*\psi_n dV = 0$$

$$\therefore \oint A_n dS + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - E_m)\int \psi_m^*\psi_n dV = 0$$

الحد الأول يتلاشى إذا كان الحجم المحتوى على المساحة dS ممتــداً امتــداداً كبيرا جدا (لا نهائيا) وذلك لتلاشي الفيض (عدم وصول خطوط المجال إلـــى حدود المساحة) .

$$\therefore \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - E_m)\int \psi_m^*\psi_n dV = 0$$

ويكون لدينا حالتان :

(١) إذا كانت :

$$E_n - E_m \neq 0 \leftarrow E_n \neq E_m \leftarrow n \neq m$$

$$\therefore \int \psi_m^*\psi_n dV = 0 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_(5)}$$

وهي الخاصية التعامدية (.orthogonal prop) .

(٢) إذا كانت :

$$E_n - E_m = 0 \leftarrow E_n = E_m \leftarrow n = m$$

$$\therefore \int \psi_m^* \psi_n dV = const.$$

ومن الخاصية الإحصائية للدالة الموجيه فإن الاحتمال الكلي لوجود جسيم في منطقة معينة يساوي الوحدة $\left(\int |\psi_n|^2 dV = 1 \right)$.

وبالمقارنة نجد أن $const. = 1$

$$\therefore \int \psi_n^* \psi_n dV = 1 \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (6)$$

وهي الخاصية العياريه (Normalization prop.) .

<u>معادلة الاتصال (أو الاستمرار) في ميكانيكا لكم</u>

<u>(Equation of continuity)</u>

حيث أن :

$$\hat{H}\psi = E\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

وأيضاً :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

$$\therefore \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \right)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad \text{\_\_\_\_\_} (1)$$

وبأخذ المرافق المركب :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \right)\psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \qquad \text{\_\_\_\_\_} (2)$$

بضرب (1) في ψ^* و (2) في ψ ، وطرح المعادلتين الناتجتين :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi + V\psi^*\psi = i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^* + V\psi\psi^* = i\hbar\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$$

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) = i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) \_\_\_\_ (3)$$

ولكن من نظرية جرين في المتجهات :

$$\vec{\nabla}\cdot(\phi\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\phi) = \phi\nabla^2\psi = \psi\nabla^2\phi$$

وتؤول المعادلة (3) إلى :

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\cdot(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)$$

بالقسمة على $i\hbar$:

$$\therefore \frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} + \frac{\hbar}{2im}\vec{\nabla}\cdot(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) = 0 \_\_\_\_ (4)$$

وبوضع $\rho = \psi^*\psi = |\psi|^2 \leftarrow$ تمثل احتمال وجود الجسيم في وحدة الحجوم (كثافة الاحتمال) Probability density

$\vec{J} = \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) \leftarrow$ يعرف بكثافة تيار الاحتمال (كثافة التيار) Probability current density

فتؤول المعادلة (4) إلى :

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0$$

وتعرف هذه المعادلة بمعادلة الاتصال أو الاستمرار (Equation of continuity) في ميكانيكا الكم ، وتشبه تماما معادلة الاتصال في علم ديناميكا الموائع (الهيدروديناميكا) والديناميكا الكهربية (الالكتروديناميكا) .

أمثلة محلولة :

مثال:(١) – أثبت أن كثافة تيار الاحتمال $\vec{J}$ يعطى بالعلاقة :

$$\vec{J} = \mathrm{Re}\left(\frac{\hbar}{im}\psi^*\vec{\nabla}\psi\right)$$

الحـل: من نظرية المتغير المركب : إذا كان :

$$Z = A + iB \text{ فإن } Z^* = A - iB$$

$$\therefore Z^* + Z = 2A = 2\underset{\downarrow}{\mathrm{Re}}\,Z \quad \therefore Z - Z^* = 2iB = 2\underset{\downarrow}{\mathrm{Im}}\,Z$$

الجزء التحليلي   الجزء الحقيقي

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) = \left(\frac{\hbar}{2im}\psi^*\vec{\nabla}\psi\right) + \left(-\frac{\hbar}{2im}\psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$$

$$= \underbrace{\left(\frac{\hbar}{2im}\psi^*\vec{\nabla}\psi\right)} + \left(\frac{\hbar}{2im}\psi^*\vec{\nabla}\psi\right)^* = Z + Z^* = 2\,\mathrm{Re}\,Z$$

$$= 2\,\mathrm{Re}\left(\frac{\hbar}{2im}\psi^*\vec{\nabla}\psi\right) = \mathrm{Re}\left(\frac{\hbar}{im}\psi^*\vec{\nabla}\psi\right)$$

وهو المطلوب .

ملحوظة : تستخدم العلاقة السابقة كثيرا في حل المسائل .

مثال(٢):- إذا كانت الدالة الموجيه لجسيم يتحرك بحريه هي :

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}$$

وكانت الحركة في اتجاه محور x (في بعد واحد) ، فأحسب :

(١) كثافة الاحتمال (ρ) .

(٢) كثافة تيار الاحتمال j_x واثبت أن j_x تساوي سرعة الجسيم .

الحـل: الدالة الموجيه

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}$$

(١) كثافة الاحتمال (ρ) :

$$\rho=\psi^{*}\psi=e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}=1 \qquad (1)$$

(٢) كثافة تيار الاحتمال (j_x) :

حيث أن :

$$\bar{J}=\frac{\hbar}{2im}(\psi^{*}\vec{\nabla}\psi-\psi\vec{\nabla}\psi^{*})$$

وفي حالة الحركة في بعد واحد فإن :

$$j_x=\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\right) \qquad (2)$$

حيث:-

$$\psi=e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}\ ,\ \psi^{*}=e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x-Et)}$$

$$\psi\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}=\psi\left(-\frac{i}{\hbar}p_x\psi^{*}\right)=-\frac{i}{\hbar}p_x\psi\psi^{*}$$

$$\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}=\psi^{*}\left(\frac{i}{\hbar}p_x\psi\right)=\frac{i}{\hbar}p_x\psi^{*}\psi$$

بالتعويض في (2):

$$j_x=\frac{\hbar}{2im}\left(\frac{i}{\hbar}p_x\psi^{*}\psi+\frac{i}{\hbar}p_x\psi\psi^{*}\right)=\frac{\hbar}{2im}\left(2\frac{i}{\hbar}p_x\psi^{*}\psi\right)=\frac{1}{m}p_x\psi^{*}\psi=\frac{p_x}{m}\rho$$

ولكن : $V_x=\frac{p_x}{m}\leftarrow p_x=mV_x$

$$\therefore j_x=V_x\rho \qquad (3)$$

وهي المعادلة المطلوبة .

في حالتنا (حالة الحركة الحرة للجسيم) فإن $\rho=1$

$$\therefore j_x=V_x$$

أي أن كثافة تيار الاحتمال = سرعة الجسم . وهو المطلوب .

مثال(٣): أحسب كثافة تيار الاحتمال المناظر للدالة $\psi = \frac{e^{ikr}}{r}$ حيث $r = (x + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}$ وأثبت أن قيمته العددية تساوي $\left(\frac{V}{r^2}\right)$ حيث V هي سرعة الجسيم .

الحل: كثافة تيار الاحتمال يعطى من :

$$\bar{J} = \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) = \text{Re}\left(\frac{\hbar}{im}\underbrace{\psi^*\vec{\nabla}\psi}\right)$$

حيث $\psi = \frac{e^{ikr}}{r^2}$, $\psi^* = \frac{e^{-ikr}}{r^2}$

ولحساب $\vec{\nabla}\psi$:

$$\vec{\nabla}\psi = \vec{\nabla}\left[\tfrac{1}{r}\cdot e^{ikr}\right] = \left(\frac{1}{r}\right)\underbrace{\vec{\nabla}(e^{ikr})} + \vec{\nabla}\left(\frac{1}{r}\right)\cdot e^{ikr}$$

$$= \left(\frac{1}{r}\right)(ike^{ikr}\hat{\vec{r}}) + \left(-\frac{\hat{\vec{r}}}{r^2}\right)(e^{ikr}) = \left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)e^{ikr}\hat{\vec{r}}$$

$$\vec{\nabla}(r) = \frac{\vec{r}}{r} = \hat{\vec{r}}$$

$$\vec{\nabla}\left(\frac{1}{r}\right) = -\frac{\hat{\vec{r}}}{r^2}$$

$$\therefore \bar{J} = \text{Re}\left(\frac{\hbar}{im}\psi^*\vec{\nabla}\psi\right) = \text{Re}\left[\left(\frac{\hbar}{im}\right)\left(\frac{e^{-ikr}}{r}\right)\cdot\left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)e^{ikr}\hat{\vec{r}}\right]$$

$$= \text{Re}\left[\left(\frac{\hbar}{im}\right)\left(\frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3}\right)\hat{\vec{r}}\right] = \text{Re}\left[\frac{\hbar k}{mr^2} - \frac{\hbar}{imr^3}\right]\hat{\vec{r}}$$

$$= \text{Re}\left[\frac{\hbar k}{mr^2} + \frac{i\hbar}{mr^3}\right]\hat{\vec{r}} = \frac{\hbar k}{mr^2}\hat{\vec{r}} = \frac{p}{mr^2}\hat{\vec{r}} = \frac{V}{r^2}\hat{\vec{r}}$$

$$p = \hbar k$$

$$p = mV$$

$$\frac{p}{m} = V$$

وهذا يعني أن القيمة العددية للمتجه $\bar{J}$ هي $\left(\frac{V}{r^2}\right)$

وهو المطلوب .

معادلات إهرنفست (Ehrenfest Equations)

باستخدام معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن بالصورة $\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$

حيث $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$ ، يكمن إثبات أنه لأي حزمة موجية فإن :

(i) $\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle p_x\rangle$

(ii) $\frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$

وتعرفان بمعادلتي إهرنفست .

وتناظر هاتين المعادلتين معادلتي الحركة في الميكانيكا الكلاسيكية

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{m}p_x \quad , \quad \frac{dp_x}{dt} = F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

ولاستنتاج هاتين المعادلتين نستخدم معادلة جرين في حالة السطح الممتد إلى مالا نهاية بالصورة :

$$\int(\nabla^2\Phi)\Psi dV = \int\Phi(\nabla^2\Psi)dV$$

وكذلك المعادلة الاتجاهية :

$$\nabla^2(x\psi) = x\nabla^2\psi + 2\underbrace{(\vec{\nabla}x)\cdot(\vec{\nabla}\psi)} = x\nabla^2\psi + 2\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

[حيث $\overline{\nabla}x = \hat{i}$ ، $(\overline{\nabla}x)\cdot(\overline{\nabla}\psi) = \hat{i}\cdot\overline{\nabla}\psi = \frac{\partial\psi}{\partial x}$]

إيجاد المعادلة الأولى لاهرنفست :

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle p_x\rangle$$

حيث أن :

$$\langle x\rangle = \int\psi^* x\psi\, dT$$

فبالتفاضل بالنسبة للزمن :

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{d}{dt}\int\psi^{*}x\psi\,dV=\int\frac{\partial}{\partial t}(\underbrace{\psi^{*}}\underbrace{x\psi})\,dV$$

$$=\int\left[\psi^{*}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)+\frac{\partial\psi^{*}}{\partial t}\cdot(x\psi)\right]dV \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (1)}$$

وبكتابة معادلة شرودنجر بالصورة :

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}\psi+V\psi=i\hbar\underbrace{\frac{\partial\psi}{\partial t}}$$

$$\therefore\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}\psi-V\psi\right] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (2)}$$

المرافق المركب:

$$\frac{\partial\psi^{*}}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}\psi^{*}-V\psi^{*}\right] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (3)}$$

بالتعويض من (3) ، (2) في (1) :

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i}{\hbar}\int\psi^{*}x\left[\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}\psi-V\psi\right]dV-\frac{i}{\hbar}\int\left[\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2}\psi^{*}-V\psi^{*}\right]x\psi\,dV$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\int\left[\psi^{*}x\nabla^{2}\psi-(\nabla^{2}\psi^{*})\underbrace{x\psi}\right]dV$$

وبأخذ السطح المحتوى داخل الحجم V امتداداً لا نهائياً فيمكن تطبيق نظرية جرين المعطاه على الحد الثاني من الطرف الأيمن :

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i\hbar}{2m}\int\left[\psi^{*}x\nabla^{2}\psi-\psi^{*}\nabla^{2}(\underbrace{x\psi})\right]dV$$

ومن علاقة المتجهات :

$$\nabla^{2}(x\psi)=x\nabla^{2}\psi+2\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$\therefore \frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i\hbar}{2m}\int\left[\psi^* x\nabla^2\psi-(\psi^* x\nabla^2\psi)+2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dV$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\int\left(-2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dV=-\frac{i\hbar}{m}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dV \qquad \hat{p}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$=\frac{1}{m}\int\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi dV$$

$$=\frac{1}{m}\underbrace{\int\psi^*\hat{p}_x\psi\, dV}=\frac{1}{m}\langle p_x\rangle$$

وهي المعادلة الأولى لاهرنفست.

<u>إيجاد المعادلة الثانية لاهرنفست :</u>

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt}=\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

حيث أن :

$$\langle p_x\rangle=\int\psi^*\hat{p}_x\psi\, dV=\int\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\, dV$$

$$\therefore \frac{d\langle p_x\rangle}{dt}=\frac{d}{dt}\int\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dV=-i\hbar\int\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dV$$

$$=-i\hbar\int\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dV$$

$$=-i\hbar\int\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dV$$

وبالتعويض عن $\frac{\partial\psi^*}{\partial t},\frac{\partial\psi}{\partial t}$ من (3) ، (2) :

$$\frac{d\langle p_x\rangle}{dt}=-i\hbar\int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-V\psi\right)\right]dV+$$

$$+i\hbar\int\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*-V\psi^*\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}dV$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - V\psi\right]dV - \int\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* - V\psi^*\right]\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dV$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int\left[\nabla^2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial}{\partial x}(\nabla^2\psi)\right]dV -$$

$$-\int\left[\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi - V\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dV$$

ومن نظرية جرين للسطح الممتد إلى مالا نهاية :-

$$\int(\nabla^2\psi^*)\frac{\partial\psi}{\partial x}dV = \int\psi^*\nabla^2\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dV = \int\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(\nabla^2\psi)dV$$

$$\therefore \frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = -\int\left[\psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\psi - V\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dV$$

$$= -\int\left[\psi^*\left(V\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x}\psi\right) - V\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]dV$$

$$= -\int\psi^*\left(\frac{\partial V}{\partial x}\psi\right)dV = \int\psi^*\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\psi\, dV = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

وهو المطلوب .

ملحوظة : بمقارنة معادلات إهرنفست والتي تشكل معادلات الحركة في ميكانيكا الكم بمعادلات الحركة في الميكانيكا الكلاسكية نجد أنهما تأخذان نفس الصورة مع استبدال الكميات الطبيعية بالقيم المتوقعة للمؤثرات المناظرة لهذه الكميات .

مثال: ــ باستخدام معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن بالصورة $\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$

حيث $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$

أثبت أنه لأي حزمه موجيه فإن :

$$\frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\left[\langle xp\rangle - \langle px\rangle\right]$$

[استخدم نظرية جرين للسطح الممتد إلى مالا نهاية بالصورة :

$$\int (\nabla^2\Phi)\Psi dV = \int \Phi\nabla^2\Psi dV$$

وكذلك المعادلة الاتجاهية الآتية

$$[\nabla^2(x^2\psi) = x^2\nabla^2\psi + 2x(\vec{\nabla}\psi) + 2\vec{\nabla}(x\psi)$$

<u>الحـل:-</u> حيث أن :

$$\langle x^2\rangle = \int \psi^2 x^2 \psi\, dT$$

$$\therefore \frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\int \psi^* x^2\psi\, dV = \int \frac{\partial}{\partial t}(\underbrace{\psi^*}\underbrace{x^2\psi})dV$$

$$= \int\left[\psi^* x^2\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^*}{\partial t}x^2\psi\right]dV \quad \text{\_\_\_\_\_}(1)$$

ومن معادلة شرودنجر :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$\therefore \frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V\right)\psi$$

والمرافق المركب لهذه المعادلة :

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V\right)\psi^*$$

بالتعويض في (1) :

$$\therefore \frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = \int\left[\psi^* x^2\cdot\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V\right)\psi - \frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - V\right)\psi^* x^2\psi\right]dV$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int\left[\psi^* x^2\nabla^2\psi - \nabla^2\psi^2\cdot(x^2\psi)\right]dV \quad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_}(2)$$

ومن نظرية جرين للسطح الممتد إلى ما لا نهاية فإن :

$$\int(\nabla^2\psi^*)(x^2\psi)dV = \int\psi^*\nabla^2(x^2\psi)dV$$

ومن المعادلة الاتجاهية :

$$\nabla^2 (x^2\psi) = x^2\nabla^2\psi + 2x(\overline{\nabla}\,\psi) + 2\overline{\nabla}(x\psi)$$

$$\therefore \int (\nabla^2\psi^*)(x^2\psi)dV = \int \psi^*\nabla^2 (x^2\psi)\,dV$$

$$= \int \psi^*\left[x^2\nabla^2\psi + 2x(\overline{\nabla}\,\psi) + 2\overline{\nabla}(x\psi)\right]dV$$

بالتعويض في (2) :

$$\frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int\left[\psi^* x^2\nabla^2\psi - \psi^* x^2\nabla^2\psi - 2\psi^* x(\overline{\nabla}\,\psi) - 2\psi^*\overline{\nabla}(x\psi)\right]dV$$

$$= -\frac{i\hbar}{m}\int\left[\psi^* x(\overline{\nabla}\,\psi) + \psi^*\overline{\nabla}(x\psi)\right]dV$$

$$= \frac{1}{m}\left[\int \psi^* x(-i\hbar\overline{\nabla})\psi\, dV + \int \psi^*(-i\hbar\overline{\nabla})x\psi\, dV\right]$$

$$= \frac{1}{m}\left[\int \psi^* x\hat{p}\,\psi\, dV + \int \psi^*\hat{p}x\,\psi\, dV\right] = \frac{1}{m}\left[\langle xp\rangle + \langle px\rangle\right]$$

وهو المطلوب .

<u>ملحوظة</u> :-

إثبات علاقة المتجهات :

$$\nabla^2 (x^2\psi) = \vec{\nabla}\cdot\overline{\nabla}(x^2\psi)$$

$$= \vec{\nabla}\cdot\left[x^2(\overline{\nabla}\,\psi) + (\overline{\nabla}x^2)\psi\right]$$

$$= x^2(\nabla^2\psi) + (\overline{\nabla}x^2)\cdot(\overline{\nabla}\,\psi) + (\overline{\nabla}x^2)\cdot(\overline{\nabla}\,\psi) + (\nabla^2 x^2)\psi$$

$$= x^2(\nabla^2\psi) + 2(\overline{\nabla}x^2)\cdot(\overline{\nabla}\,\psi) + (\nabla^2 x^2)\psi \qquad \overline{\nabla}x^2 = (2x)\vec{i}$$

$$= x^2(\nabla^2\psi) + 4x(\overline{\nabla}\,\psi) + 2\psi \qquad \nabla^2 x^2 = 2$$

$$= x^2(\nabla^2\psi) + 2x(\overline{\nabla}\,\psi) + \left[2x(\overline{\nabla}\,\psi + 2\psi)\right] \qquad \vec{\nabla}x = (1)\vec{i}$$

$$= x^2(\nabla^2\psi) + 2x(\overline{\nabla}\,\psi) + 2\overline{\nabla}(x\psi)$$

معادلة هيزنبرج لمعدل التغير الزمني لمؤثر ما (Heisenberg Equation) :

يمكن إثبات أن معدل التغير الزمني لمؤثر ما $(\hat{A})$ أي $\frac{d\hat{A}}{at}$

في ميكانيكا الكم يعطي بمعادلة هيزنبرج وهي : ـ

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{H}\right]$$

حيث $\left[\hat{A},\hat{H}\right]$ هو مبدول المؤثر $\hat{A}$ مع الهاملتونيان $\hat{H}$.

أو بصورة أخرى باستخدام تعريف القيمة المتوقعة للمؤثرات :

$$\frac{d}{dt}<\hat{A}>=<\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}>+\frac{1}{i\hbar}<\left[\hat{A},\hat{H}\right]>$$

الإثبات : من تعريف القيمة المتوقعة لكمية طبيعية : $<A>=\int\psi^*\hat{A}\psi\,d\tau$

وبالتفاضل بالنسبة للزمن :

$$\frac{d<A>}{dt}=\frac{d}{dt}\int\psi^*\hat{A}\psi\,d\tau=\int\frac{\partial}{\partial t}\left(\underbrace{\psi^*}\underbrace{\hat{A}\psi}\right)d\tau$$

$$=\int\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\left(\hat{A}\psi\right)+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi\right]d\tau$$

$$=\int\left[\psi^*\left(\hat{A}\underbrace{\frac{\partial\psi}{\partial t}}+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right)+\underbrace{\frac{\partial\psi^*}{\partial t}}\hat{A}\psi\right]d\tau$$

ولكن من معادلة شرودنجر نجد أن : $\hat{H}\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \leftarrow \frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi$

أيضاً : $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}H\psi^*$

بالتعويض في (1) :

$$\frac{d<A>}{dt}=\int\left[\psi^*\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{A}\hat{H}\psi+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right)+\left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi^*\right)\hat{A}\psi\right]d\tau \quad \_\_\_\_\_ (2)$$

وحيث أن كل المؤثرات في ميكانيكا الكم هي مؤثرات هيرميتيه (تبعاً لديراك) فيكون مؤثر هاملتون $\hat{H}$ هو مؤثر هيرميتي .

$$\left(\psi, \hat{H}\,\underbrace{\hat{A}\,\psi}\right) = \left(\hat{H}\psi, \hat{A}\,\psi\right)$$

$$\therefore \int \psi^* \hat{H}\,\underbrace{\hat{A}\,\psi}\, d\tau = \int \hat{H}\,\psi^*\,\underbrace{\hat{A}\,\psi}\, d\tau \qquad \_\_\_\_\_\_\_\_ (3)$$

بالتعويض من (3) في (2) :

$$\frac{d<A>}{dt} = \int \left[\psi^* \left(\frac{1}{i\hbar}\hat{A}\hat{H}\psi + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi\right) + \left(-\frac{1}{i\hbar}\right)\psi^* \hat{H}\,\hat{A}\,\psi\right] d\tau$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi\, d\tau + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^* \left(\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}\right)\psi\, d\tau$$

$$= \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi\, d\tau + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^* \left[\hat{A}, \hat{H}\right]\psi\, d\tau \qquad \_\_\_\_\_\_\_\_ (4)$$

حيث $\left[\hat{A}, \hat{H}\right] = \hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}$

وحيث أن : القيمة المتوقعة لمعدل التغير الزمي لكمية = معدل التغير الزمني للقيمة المتوقعة للكمية :

$$\therefore < \frac{dA}{dt} > = \frac{d}{dt} < A >$$

$$\therefore \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt}\psi\, d\tau = \frac{d}{dt} < A > \qquad \_\_\_\_\_\_\_\_ (5)$$

من (5) و (4) :

$$\therefore \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt}\psi\, d\tau = \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi\, d\tau + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^* \left[\hat{A}, \hat{H}\right]\psi\, d\tau$$

$$= \int \psi^* \left\{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}, \hat{H}\right]\right\} \psi\, d\tau$$

وهذا يعني أن :

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{H}\right]$$

وهي معادلة هيزنبرج لمعدل التغير الزمني لمؤثر ما .

وهذه المعادلة يمكن أيضاً كتابتها بصورة أخرى ، باعتبار تعريف القيمة المتوقعة لمؤثر ما ، فبأخذ القيمة المتوقعة لطرفي هذه العلاقة نحصل على :

$$<\frac{d\hat{A}}{dt}>=\frac{d<\hat{A}>}{dt}=<\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}>+\frac{1}{i\hbar}<\left[\hat{A},\hat{H}\right]>$$

الصورة :

$$\frac{d<\hat{A}>}{dt}=<\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}>+\frac{1}{i\hbar}<\left[\hat{A},\hat{H}\right]>$$

هي صورة أخرى لمعادلة هيزنبرج .

<u>حالة خاصة :</u> إذا كان المؤثر $\hat{A}$ لا يعتمد صراحة على الزمن فإن :

$$\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}=0$$

وتؤول معادلة هيزنبرج إلى :

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{H}\right]=\left\{\hat{A},\hat{H}\right\}$$

حيث

$$\left\{\hat{A},\hat{H}\right\}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{H}\right]=\frac{1}{i\hbar}\left(\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A}\right)$$

يسمى قوس بواسون الكمي (Quantum Poisson's Bracket) .

<u>ثوابت الحركة (Constants of Motion)</u>

إذا كان المؤثر $\hat{A}$ متبادلاً مع المؤثر $\hat{H}$ أي إذا كان : $\left[\hat{A},\hat{H}\right]=0$ فإن معدل تغير $\hat{A}$ بالنسبة للزمن (من معادلة هيزنبرج) $\frac{d\hat{A}}{dt}=0$ وبالتالي فإن

$$\hat{A}=const.$$

ويعرف $\hat{A}$ حينئذ بأنه ثابت للحركة (constant of motion) .

∴ أي مؤثر يكون متبادلا مع $\hat{H}$ فهو ثابت للحركة .

أمثلة محلولة :

مثال (١) : باستخدام معادلة هيزنبرج لمعدل التغير الزمني لمؤثر في ميكانيكا الكم بالصورة :

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{H}\right]$$

بين كيف تحصل على قانون المشتقة الزمنية لحاصل ضرب مؤثرين بالصورة الآتية :

$$\frac{d\left(\hat{A}\hat{B}\right)}{dt}=\hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}+\frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B}$$

الحـل :

من معادلة هيزنبرج :

$$\frac{d\left(\hat{A}\hat{B}\right)}{dt}=\frac{\partial\left(\hat{A}\hat{B}\right)}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}\hat{B},\hat{H}\right] \qquad \text{———} (1)$$

ولكن :

$$\frac{\partial\left(\hat{A}\hat{B}\right)}{\partial t}=\hat{A}\frac{\partial\hat{B}}{\partial t}+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{B}\ ,\ \left[\hat{A}\hat{B},\hat{H}\right]=\hat{A}\left[\hat{B},\hat{H}\right]+\left[\hat{A},\hat{H}\right]\hat{B}$$

بالتعويض في (1) :

$$\frac{d\left(\hat{A}\hat{B}\right)}{dt}=\hat{A}\frac{\partial\hat{B}}{\partial t}+\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\hat{B}+\frac{1}{i\hbar}\left\{\hat{A}\left[\hat{B},\hat{H}\right]+\left[\hat{A},\hat{H}\right]\hat{B}\right\}$$

$$=\hat{A}\left\{\frac{\partial\hat{B}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{B},\hat{H}\right]\right\}+\left\{\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{H}\right]\right\}\hat{B}$$

$$=\hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}+\frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B}$$

وهو المطلوب .

مثال (٢) : أثبت أن مؤثر كمية الحركة الخطية $\hat{p}_x$ يمثل أحد ثوابت الحركة الحرة للجسيمات .

الحـــل :

تتميز الحركة الحرة للجسيمات بأن المجال الذي يتحرك فيه الجسيم لـــه جهــد يساوي الصفر أي أن V = 0 للحركة الحرة (Free motion) .

ويكون مؤثر هاملتون للحركة الحرة : $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

ولإثبات أن $\hat{p}_x$ هو أحد ثوابت الحركة نثبت أن : $\left[\hat{p}_x, \hat{H}\right] = 0$

$$\left[\hat{p}_x, \hat{H}\right]\psi = \left(\hat{p}_x\hat{H} - \hat{H}\,\hat{p}_x\right)\psi = \left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) - \right.$$

$$\left. -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\psi$$

$$= \left[-\frac{\hbar^3}{2im}\frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{\hbar^3}{2im}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\right]\psi = 0\,\psi$$

$$\therefore \left[\hat{p}_x, \hat{H}\right] = \hat{0}$$

وهذا يعني أن $\hat{p}_x$ يمثل أحد ثوابت الحركة الحرة للجسيمات .

<u>مثال (٣) :</u> إذا كان كل من $\hat{A}, \hat{B}$ يمثل ثابتاً من ثوابـــت الحركـــة، فأثبـــت أن مبدولهما أي $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ هو أيضاً ثابت للحركة .

<u>الحـــل :</u>

بما أن $\hat{A}, \hat{B}$ ثابتان للحركة فيكون :

$$\left[\hat{A}, \hat{H}\right] = 0 \quad , \quad \left[\hat{B}, \hat{H}\right] = 0$$

المطلوب إثبات أن : $\left[\left[\hat{A}, \hat{B}\right], \hat{H}\right] = 0$

$$\left[\left[\hat{A}, \hat{B}\right], \hat{H}\right]\psi = \left[\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right), \hat{H}\right]\psi = \left[\hat{A}\hat{B}, \hat{H}\right]\psi - \left[\hat{B}\hat{A}, \hat{H}\right]\psi$$

$$= \left\{\hat{A}\left[\hat{B}, \hat{H}\right] + \left[\hat{A}, \hat{H}\right]\hat{B} - \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{H}\right] - \left[\hat{B}, \hat{H}\right]\hat{A}\right\}\psi = \{0\}\psi$$

$$\therefore \left[\left[\hat{A}, \hat{B}\right], \hat{H}\right] = 0$$

وهو المطلوب .

وقد استخدمنا هنا العلاقة

$$\left[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\right]=\hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B}$$

<u>مثال (٤)</u> : ـ أثبت معادلتي إهرنفست في ميكانيكا الكم باستخدام معادلة هيزنبرج .

<u>الحل :</u>

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left\langle\ \left[\hat{A},\hat{H}\right]\right\rangle$$

حيث المؤثرات التي سنتعامل معها هنا لا تعتمد صراحة على الزمن .

يمكن إثبات معادلتي إهرنفست كالتالي :

<u>إثبات المعادلة الأولى</u> :

بأخذ $\hat{A}=\hat{x}=x$

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left\langle\ \left[x,\hat{H}\right]\right\rangle \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_}(1)$$

<u>ولحساب المبدول</u> $\left[x,\hat{H}\right]$:

$$\left[x,\hat{H}\right]\psi=\left(x\hat{H}-\hat{H}x\right)\psi=x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)\psi-\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)x\psi$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[x\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}x\right]\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi)\right] \qquad \text{\_\_\_}(2)$$

ولكن :

$$\frac{\partial^2(x\psi)}{\partial x^2}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right]=\frac{\partial}{\partial x}\left[x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi\right]$$

$$=x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\partial\psi}{\partial x}=x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+2\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

بالتعويض في (2) :

$$\therefore \left[x,\hat{H}\right]\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \left(x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \left(\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi$$

$$\therefore \left[x,\hat{H}\right] = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}$$

بالتعويض في (1) :

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x}\right\rangle = \frac{1}{m}\left\langle\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}_x\rangle \qquad \text{(I)}$$

حيث $\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$

المعادلة (I) هي المعادلة الأولى لاهرنفست .

<u>إثبات المعادلة الثانية</u> :

بأخذ $\hat{A} = \hat{p}_x$

$$\therefore \frac{d\langle\hat{p}_x\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{p}_x,\hat{H}\right]\right\rangle \qquad (3)$$

<u>ولحساب المبدول</u> $\left[\hat{p}_x,\hat{H}\right]$:

$$\left[\hat{p}_x,\hat{H}\right]\psi = \left(\hat{p}_x\hat{H} - \hat{H}\hat{p}_x\right)\psi = \left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right) - \right.$$

$$\left. - \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\psi$$

$$= \left[-\frac{\hbar^3}{2im}\frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\hbar^3}{2im}\frac{\partial^3}{\partial x^3} - V\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}V\psi - V\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(V\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x}\psi - V\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)\psi$$

$$\therefore \left[\hat{p}_x, \hat{H}\right] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x} = i\hbar\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)$$

بالتعويض في (3) :

$$\therefore \frac{d\langle \hat{p}_x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle i\hbar\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\right\rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \qquad \text{(II)}$$

المعادلة (II) هي معادلة إهرنفست الثانية .

ولما كان

$$\langle \hat{F}_x \rangle = \frac{d\langle \hat{p}_x \rangle}{dt} \leftarrow \hat{F}_x = \frac{d\,\hat{p}_x}{dt} \qquad \leftarrow F_x = \frac{d\,p_x}{dt}$$

$$\therefore \langle \hat{F}_x \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \qquad \text{(III)}$$

وهي صورة أخرى لمعادلة إهرنفست الثانية .

مسائل

(١) أثبت أن المؤثر $\hat{A} = i\left(\hat{p}^2 q - q\hat{p}^2\right)$ حيث $q, \hat{p}$ هما مؤثراً الموضع وكمية الحركة على التوالي ، هو مؤثر هيرميتي ، مع ملاحظة أن كل من $q, \hat{p}$ يشكل مؤثراً هيرميتياً .

(٢) إذا كان $\hat{A}$ مؤثر ما ، وكان $\hat{A}'$ يعرف بالعلاقة : $\hat{A}' = \left[\hat{A}, \hat{H}\right]$ حيث $\hat{H}$ هو مؤثر هاملتون ، فأثبت أن $\hat{A}'$ هو مؤثر تفاضلي يحقق العلاقات الآتية :

(i) $\left(\hat{A} + \hat{B}\right)' = \hat{A}' + \hat{B}'$

(ii) $\left(\hat{A}\hat{B}\right)' = \hat{A}\hat{B}' + \hat{A}'\hat{B}$

(iii) $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]' = \left[\hat{A}, \hat{B}'\right] + \left[\hat{A}', \hat{B}\right]$

(٣) باستخدام معادلة هيزنبرج لمعدل التغير الزمني لمؤثر في ميكانيكا الكم ، أحسب كل من $\frac{dq}{dt}, \frac{d\hat{p}}{dt}$ لجسيم له الهاملتونيان

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 + \alpha q^3$$

حيث $q, \hat{p}$ هما مؤثراً الموضع وكمية الحركة للجسيم على التوالي ، ويرتبطان بالعلاقة التبادلية : $[\hat{p}, \hat{q}] = \frac{\hbar}{i} \hat{I}$.

(٤) أثبت أن الفرق بين المؤثرين :

$$\left(x^2 p_x^2 + p_x^2 x^2\right) \ , \ \frac{1}{2}\left(x p_x + p_x x\right)^2$$

يكون من رتبة $\hbar^2$.

الحلول

حل المسألة رقم (١) :

$$\hat{A} = i\left(\hat{p}^2 q - q\,\hat{p}^2\right) = i\left(\hat{p}\hat{p}\,q - q\,\hat{p}\hat{p}\right)$$
$$\hat{A}^+ = -i\left\{(\hat{p}\hat{p}\,q)^+ - (q\,\hat{p}\hat{p})^+\right\} = -i\left\{q^+\,\hat{p}^+\hat{p}^+ - \hat{p}^+\hat{p}^+ q^+\right\}$$

وحيث أن $q, \hat{p}$ هما مؤثران هيرميتيان فإن :

$$q^+ = q \;, \hat{p}^+ = \hat{p}$$

$$\therefore \hat{A}^+ = -i\left\{q\,\hat{p}\hat{p} - \hat{p}\hat{p}\,q\right\} = -i\left\{q\,\hat{p}^2 - \hat{p}^2\,q\right\} = i\left(\hat{p}^2\,q - q\,\hat{p}^2\right) = \hat{A}$$
$$\therefore \hat{A}^+ = \hat{A}$$

وهذا يعني أن المؤثر $\hat{A}$ المعطي هو مؤثر هيرميتي .

حل المسألة (٢) :

حيث أن $\hat{A}' = \left[\hat{A}, \hat{H}\right]$ فإن :

(i) $$\left(\hat{A} + \hat{B}\right)' = \left[\hat{A} + \hat{B}, \hat{H}\right] = \left[\hat{A}, \hat{H}\right] + \left[\hat{B}, \hat{H}\right] = \hat{A}' + \hat{B}' \qquad (i)$$

(ii) $$\left(\hat{A}\hat{B}\right)' = \left[\hat{A}\hat{B}, \hat{H}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{H}\right] + \left[\hat{A}, \hat{H}\right]\hat{B}$$

وذلك باستخدام العلاقة :

$$\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}$$
$$\therefore \left(\hat{A}\hat{B}\right)' = \hat{A}\hat{B}' + \hat{A}'\hat{B} \qquad (ii)$$

(iii) $$\left[\hat{A}, \hat{B}\right]' = \left[\left[\hat{A}, \hat{B}\right], \hat{H}\right] = \left[\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right), \hat{H}\right] = \left[\hat{A}\hat{B}, \hat{H}\right] - \left[\hat{B}\hat{A}, \hat{H}\right]$$

ولكن :

$$\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B}$$

$$\therefore \left[\hat{A},\hat{B}\right]' = \hat{A}\left[\hat{B},\hat{H}\right]+\left[\hat{A},\hat{H}\right]\hat{B}-\hat{B}\left[\hat{A},\hat{H}\right]-\left[\hat{B},\hat{H}\right]\hat{A}$$
$$=\hat{A}\hat{B}'+\hat{A}'\hat{B}-\hat{B}\hat{A}'-\hat{B}'\hat{A}=\left(\hat{A}\hat{B}'-\hat{B}'\hat{A}\right)+\left(\hat{A}'\hat{B}-\hat{B}\hat{A}'\right)$$
$$=\left[\hat{A},\hat{B}'\right]+\left[\hat{A}',\hat{B}\right] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (iii)$$

<u>حل المسألة (٣)</u> : حيث أن الهاملتونيان المعطي لا يعتمد صراحة على الزمن فنستخدم معادلة هيزنبرج بالصورة

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A},\hat{H}\right]$$
$$\frac{dq}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[q,\hat{H}\right]=\frac{1}{i\hbar}\left[q,\left(\hat{p}^2\big/2m+\frac{1}{2}m\omega^2q^2+\alpha q^3\right)\right]$$
$$=\frac{1}{i\hbar}\left[q,\hat{p}^2\big/2m\right]+\frac{1}{i\hbar}\left[q,\frac{1}{2}m\omega^2q^2\right]+\frac{1}{i\hbar}\left[q,\alpha q^3\right]$$
$$=\frac{1}{2i\hbar m}\left[q,\hat{p}^2\right]+\frac{m\omega^2}{2i\hbar}\left[q,q^2\right]+\frac{\alpha}{i\hbar}\left[q,q^3\right] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_} (1)$$

ولكن :

$$\left[q,\hat{p}^2\right]=\left[q,\hat{p}\hat{p}\right]=\left[q,\hat{p}\right]\hat{p}+\hat{p}\left[q,\hat{p}\right]=-\left[\hat{p},q\right]\hat{p}-\hat{p}\left[\hat{p},q\right]$$
$$=-\left(\frac{\hbar}{i}\hat{I}\right)\hat{p}-\hat{p}\left(\frac{\hbar}{i}\hat{I}\right)=-\frac{2\hbar}{i}\hat{p}\hat{I}=2i\hbar\,\hat{p}\hat{I}$$
$$\left[q,q^2\right]=\left[q,qq\right]=\left[q,q\right]q+q\left[q,q\right]=(0)q+q(0)=0$$
$$\left[q,q^3\right]=\left(q\cdot q^3-q^3\cdot q\right)=0$$

بالتعويض في (1) :

$$\therefore \frac{dq}{dt}=\frac{1}{2i\hbar m}\cdot\left(2i\hbar\,\hat{p}\,\hat{I}\right)+0+0=\hat{p}\big/m\;\hat{I} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_} (I)$$

أيضاً :

$$\frac{d\hat{p}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p},\hat{H}\right]=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p},\left(\hat{p}^2\big/2m+\frac{1}{2}m\omega^2q^2+\alpha q^3\right)\right]$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}, \hat{P}^2 \Big/ 2m\right] + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}, \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right] + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{p}, \alpha q^3\right]$$

$$= \frac{1}{2i\hbar m}\left[\hat{p}, \hat{p}^2\right] + \frac{m\omega^2}{2i\hbar}\left[\hat{p}, q^2\right] + \frac{\alpha}{i\hbar}\left[\hat{p}, q^3\right] \qquad \text{\_\_\_\_\_\_} (2)$$

ولكن :

$$\left[\hat{p}, \hat{p}^2\right] = \left[\hat{p}, \hat{p}\hat{p}\right] = \left[\hat{p}, \hat{p}\right]\hat{p} + \hat{p}\left[\hat{p}, \hat{p}\right] = 0(\hat{p}) + \hat{p}(0) = 0$$

$$\left[\hat{p}, q^2\right] = \left[\hat{p}, \hat{q}\hat{q}\right] = \left[\hat{p}, \hat{q}\right]\hat{q} + \hat{q}\left[\hat{p}, \hat{q}\right] = \left(\frac{\hbar}{i}\hat{I}\right)q + q\left(\frac{\hbar}{i}\hat{I}\right) = \frac{2\hbar}{i}q\,\hat{I}$$

$$\left[\hat{p}, q^3\right] = \left[\hat{p}, q^2 q\right] = \left[\hat{p}, q^2\right]q + q^2\left[\hat{p}, \hat{q}\right] = \left(\frac{2\hbar}{i}q\,\hat{I}\right)q + q^2\left(\frac{\hbar}{i}\hat{I}\right) = \frac{3\hbar}{i}q^2\,\hat{I}$$

بالتعويض في (2) :

$$\therefore \frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{2i\hbar m}\cdot(0) + \frac{m\omega^2}{2i\hbar}\cdot\left(\frac{2\hbar}{i}q\,\hat{I}\right) + \frac{\alpha}{i\hbar}\left(\frac{3\hbar}{i}q^2\,\hat{I}\right)$$

$$= \left(-m\omega^2 q - 3\alpha q^2\right)\hat{I} \qquad \text{\_\_\_\_\_\_\_\_} (\mathrm{II})$$

وهو المطلوب .

<u>حل المسألة رقم (٤)</u> : المطلوب إثبات أن :

$$\left(x^2 p_x^2 + p_x^2 x^2\right) - \frac{1}{2}\left(x p_x + p_x x\right)^2 = 0(\hbar^2)$$

$$L.H.S = \left(x^2 p_x^2 + p_x^2 x^2\right) - \frac{1}{2}\left(x p_x + p_x x\right)^2$$

$$= \frac{1}{2}\left(x^2 p_x^2 + x^2 p_x^2 + p_x^2 x^2 + p_x^2 x^2\right) -$$

$$- \frac{1}{2}\left(x p_x x p_x + x p_x^2 x + p_x x^2 p_x + p_x x p_x x\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\left(x^2 p_x^2 - x p_x^2 x\right) + \left(p_x^2 x^2 - p_x x^2 p_x\right) + \right.$$

$$\left. + \left(x^2 p_x^2 - x p_x x p_x\right) + \left(p_x^2 x^2 - p_x x p_x x\right)\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{x\left[x, p_x^2\right] + p_x\left[p_x, x^2\right] + x\left[x, p_x\right]p_x + p_x\left[p_x, x\right]x\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{2i\hbar\, x\, p_x - 2i\hbar\, p_x x + i\hbar\, x\, p_x - i\hbar\, p_x\, x\right\}$$

وذلك حيث أن :

$$[x, p_x] = i\hbar \ , \ [p_x, x] = -i\hbar$$

$$\left[x, p_x^2\right] = [x, p_x]p_x + p_x[x, p_x] = i\hbar\, p_x + p_x(i\hbar) = 2i\hbar\, p_x$$

$$\left[p_x, x^2\right] = x[p_x, x] + [p_x, x]x = x(-i\hbar) + (-i\hbar)x = -2i\hbar\, x$$

$$L.H.S. = \frac{1}{2}\left\{\left(2i\hbar[x, p_x] + i\hbar[x, p_x]\right)\right\}$$

$$= \frac{3}{2}i\hbar[x, p_x] = \frac{3}{2}i\hbar(i\hbar) = -\frac{3}{2}\hbar^2 = 0(\hbar^2)$$

وهو المطلوب .